

УДК 004.414

https://doi.org/10.33619/2414-2948/62/21

ИНФОРМАЦИОННАЯ СИСТЕМА ДЛЯ РЕГИСТРАЦИИ РЕЗУЛЬТАТОВ ИССЛЕДОВАНИЙ ХИМИКА-СИНТЕТИКА

©*Дмитриева Ю. А.*, ORCID: 0000-0003-0475-3387, Поволжский государственный университет телекоммуникаций и информатики, г. Самара, Россия, julia.istomina2010@yandex.ru

©*Лиманова Н. И.*, ORCID: 0000-0003-2924-5602, д-р техн. наук, Поволжский государственный университет телекоммуникаций и информатики, г. Самара, Россия, nataliya.i.limanova@gmail.com

©*Губин В. В.*, ORCID: 0000-0001-7546-8669, Поволжский государственный университет телекоммуникаций и информатики, г. Самара, Россия, assignnik@gmail.com

INFORMATION SYSTEM FOR REGISTRATION OF RESEARCH RESULTS OF A SYNTHETIC CHEMIST

©*Dmitrieva Yu.*, ORCID: 0000-0003-0475-3387, Povolzhskiy State University of Telecommunications and Informatics, Samara, Russia, julia.istomina2010@yandex.ru

©*Limanova N.*, ORCID: 0000-0003-2924-5602, Dr. habil., Povolzhskiy State University of Telecommunications and Informatics, Samara, Russia, nataliya.i.limanova@gmail.com

©*Gubin V.*, ORCID: 0000-0001-7546-8669, Povolzhskiy State University of Telecommunications and Informatics, Samara, Russia, assignnik@gmail.com

Аннотация. В данной статье описана информационная система, представляющего собой электронную версию лабораторного журнала химика-синтетика. Представлен обзор базовых функциональных возможностей программы.

Abstract. This article describes the information system, which is an electronic version of the laboratory journal of chemist-synthetics. An overview of the basic functionality of the program is presented.

Ключевые слова: системы учета результатов исследований, лабораторные системы учета, лабораторный журнал, органический синтез, лабораторная база данных, электронная лабораторная записная книжка.

Keywords: research accounting systems, laboratory information systems, laboratory journal, organic synthesis, laboratory database, electronic laboratory notebook.

Введение

Лабораторный журнал химика-синтетика или лабораторная записная книжка — это рукописный текст с химическими формулами, схемами химических реакций, химическими расчетами, иллюстрациями, графиками, представляющий собой набор протоколов всех экспериментов, поставленных автором в лаборатории более или менее независимо. Задача состоит в том, чтобы создать персональную лабораторную информационную систему для

ведения такого журнала в электронном виде. Такая система обеспечит сохранность данных, поможет химику-синтетику фиксировать каждый шаг своей работы, заносить в журнал всю сопутствующую информацию, используемую в процессе планирования и проведения химического синтеза (реактивы, расчеты количеств исходных соединений для синтеза, физические константы, файлы с аналитическими данными и т. д.), структурировать научный материал и планировать научно-исследовательскую работу. Также лабораторный журнал может быть использован в качестве юридического документа в случаях судебных разбирательств в отношении интеллектуальной собственности и при передаче на рассмотрение экспертам при выдаче патентов.

Результаты и обсуждение

С каждым годом информационные технологии все активнее развиваются и внедряются в разные сферы деятельности человека, в том числе и в область химии. На сегодняшний день на рынке информационных услуг существует большое количество информационных систем для автоматизации работы химико-аналитических лабораторий, например, ЛИС ALTEY Laboratory (НПО «АЛТЭЙ», Россия), LabWare LIMS («LabWare», США), LabExpert (Аналитический Центр Калининградского ТФГИ), АРМ/ЛИС/ЛИУС «Химик-аналитик» («НИИ ВН», Россия), Q-DIS\QM LIMS («Waters», США, до 2003 г. «Creon Lab Control AG»), ЛИС «Электронный метролог» (ФГУП «УНИИМ», Россия) и другие [1]. Обычно с такими системами интегрируются электронные лабораторные записные книжки. За последние годы разработано достаточное количество электронных лабораторных записных книжек, предлагающих интеллектуальные решения для документирования лабораторных данных, среди них Labstep, LabArchives, Labfolder, Benchling, Mbook, E-NOTEBOOK, sciNote, RSpace, eLabJournal, Signals Notebook и другие [2]. Перечисленные электронные журналы удобны в использовании, имеют интуитивно понятный интерфейс и множество полезных инструментов, к примеру, управление запасами или интеграция с другими программами, хранение файлов различных типов, обмен контентом, безопасность и т. д.

В Таблице 1 представлены основные требования, предъявляемые к информационной системе для регистрации результатов исследований.

Таблица 1 .

ОСНОВНЫЕ ТРЕБОВАНИЯ К ИНФОРМАЦИОННЫМ СИСТЕМАМ ДЛЯ РЕГИСТРАЦИИ РЕЗУЛЬТАТОВ ИССЛЕДОВАНИЙ

<i>Требование</i>	<i>Цель</i>
Безопасность	Защита от несанкционированного доступа.
Гибкость	Изменение существующих или внедрение новых процессов без необходимости дальнейшей разработки программного обеспечения.
Модульная архитектура	Минимизация затрат на любые последующие изменения.
Возможность хранения данных	Данные в системе должны храниться в базе данных и быть доступными для поиска.
Возможность планирования	Система должна включать вариант планирования сроков исследований и других процедур.

Несмотря на такое количество существующих лабораторных записных книжек, их sporadическое внедрение все еще отражает несоответствие между предлагаемыми решениями, реальными потребностями химиков и ресурсами химических лабораторий. Электронные лабораторные журналы должны быть доступными, удобными в использовании,

простыми для понимания и модулируемыми без дополнительных затрат. Последняя функция может быть предложена только проектом с открытым исходным кодом.

Предлагаемая ниже информационная система поможет химику-синтетику упорядочить и структурировать данные по каждому проводимому синтезу путем автоматизации рабочего журнала. Для понимания необходимости создания такого журнала рассмотрим основные принципы работы лаборатории органического синтеза. На Рисунке 1 представлена диаграмма процесса работы лаборатории органического синтеза и отражены основные этапы синтеза органического соединения.

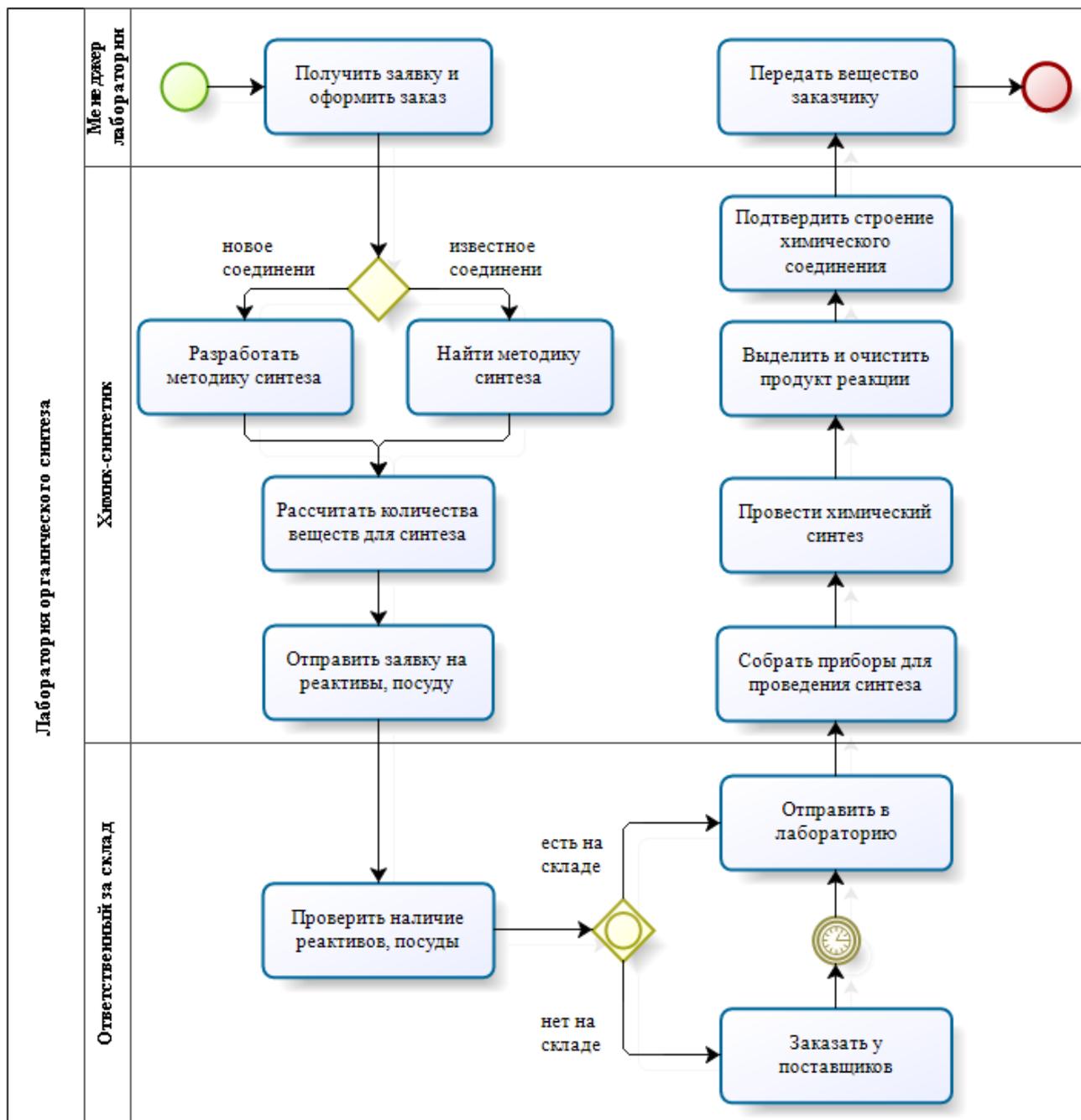


Рисунок 1. Диаграмма процесса работы лаборатории органического синтеза.

Начальным этапом работы химика-синтетика является планирование синтеза — анализ литературных источников данных и выбор оптимального пути синтеза целевого соединения из коммерчески доступных исходных реагентов. Далее проводятся расчеты для определения количеств реагентов, которые будут использованы в процессе проведения химической реакции. На этом этапе у химика перед глазами должна быть схема и методика синтеза. Разрабатываемая информационная система будет автоматически рассчитывать массу и объем химических соединений, вступающих в реакцию, исходя из их химических количеств, что позволит исключить фактор человеческой ошибки на этапе расчета синтеза. Чтобы точно контролировать внесение данных на каждом этапе работы химика-синтетика, должна быть возможность показывать или скрывать отдельные разделы с данными.

Следующий этап — непосредственно, сам синтез целевого соединения. Время постановки синтеза, порядок и скорость добавления реагентов, температура реакционной смеси - все эти особенности проведения реакции химик-синтетик, как правило, записывает в рабочий журнал. Теперь можно будет фиксировать их в системе с помощью встроенного текстового редактора. Найти методику и расчеты по синтезу, который проводился ранее, будет намного проще — все данные будут находиться в разделах «Синтезы» и «Календарь».

Проведение химической реакции, выделение и очистка продукта связаны с использованием химических реактивов и стеклянной посуды. Информационная система позволит настроить взаимосвязь со складом для отправки электронных заявок на получение посуды и реактивов, а также вести учет посуды и химических реактивов в лаборатории.

Для контроля полноты протекания реакции обычно используют тонкослойную хроматографию, высокоэффективную жидкостную хроматографию или газо-жидкостную хроматографию. Создаваемая информационная система поможет смоделировать пластинку с результатами тонкослойной хроматографии по коэффициентам удерживания либо загрузить изображение с пластинкой, а также сохранит время удерживания химического соединения.

Наиболее сложным этапом работы является процесс выделения продукта реакции, который заключается в отделении целевого соединения от растворителя, побочных продуктов реакции, оставшихся реагентов. Сначала реакционную смесь обрабатывают, экстрагируют и затем упаривают растворитель. Далее продукт очищают с использованием следующий методов: кристаллизация, перегонка, хроматография. Очистка продукта от примесей исходных реагентов и побочных продуктов реакции необходима для идентификации полученного вещества. Методы очистки также будут фиксироваться в информационной системе вместе с выходами продуктов реакции.

Идентификация полученного вещества — установление структуры вещества аналитическими методами и определение его характеристических констант (температуры кипения, плавления, плотности, показателя преломления и др.), которые являются также критериями чистоты. Структура нового соединения подтверждается спектральными методами: спектроскопией ядерного магнитного резонанса, инфракрасной, ультрафиолетовой спектроскопией, масс-спектрометрией. В программе будет возможность прикреплять файлы любых типов и изображения со спектральными данными, записывать физические константы и выводить протокол по каждому синтезу на печать. Информационная система позволит регистрировать различные типы результатов (количественные, качественные, текстовые). Внесенные в систему результаты сохранятся на неограниченное время.

Создан прототип информационной системы для регистрации результатов исследований химика-синтетика. Отличительной особенностью данной системы являются полнота и наглядность представления данных по конкретному синтезу. Нет необходимости переходить на отдельные вкладки, чтобы просмотреть методику или результаты проведения синтеза. Представленная информационная система имеет интуитивно понятный интерфейс, простое меню и дизайн, ограниченное количество разделов, вся информация структурирована. В то же время использование контрастных цветов значительно упрощает задачу пользователю. На Рисунке 2 представлена заполненная при проведении синтеза дигомоадамтан [4,5-*b*;4,5-*e*]пиразина вкладка интерфейса информационной системы.

Главная

Заявки 2

Синтезы +

Производные адамантана

Производные гомоадамтанана

- Синтез гомоадамтан-4-она
- Синтез гомоадамтан-4,5-диона
- Синтез 5-(гидроксимино) гомоадамтан-4-она
- Синтез гомоадамтан-4,5-диола
- Синтез дигомоадамтан [4,5-*b*;4,5-*e*]пиразина

Склад

Лабораторная посуда

Реактивы

Статьи

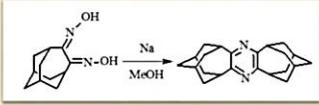
Календарь

Настройки

Синтез дигомоадамтан[4,5-*b*;4,5-*e*]пиразина

Дата: 02.10.2020

Схема синтеза



Методика синтеза

Металлический натрий (3.2 г, 0.139 моль) добавляют к перемешиваемому раствору, содержащему диоксим гомоадамтан-4,5-дион (1 г, 0.005 моль) и метиловый спирт (15 мл). После растворения всего количества натрия добавляют воду. Метиловый спирт упаривают, остаток экстрагируют дихлорметаном. Органический слой сушат над безводным Na₂SO₄. Дихлорметан упаривают. Продукт перекристаллизовывают из изопропилового спирта.

Ход синтеза

10-00 - начало синтеза.
 11-00 – натрий растворился.

	Диоксим гомоадамтан-4,5-диона	Металлический натрий	Метиловый спирт
n (моль)	0.005	0.139	0.371
M (г/моль)	208	23	32
m (г)	1	3.2	11.9
V (мл)	-	-	15 мл
ρ (г/мл)			0,7918

Аналитические данные

Т. пл. 294-296°C.

ИК (KBr), ν, см⁻¹: 2908, 2854 (CH_{НомоAd}), 1631, 1608 (C=N).

Масс-спектр, m/z (I_{отн}, %): 320 [M⁺] (66), 251 (14), 195 (8).

Спектр ЯМР¹H (400 МГц, DMSO), δ, м. д. (J, Гц): 1.77-1.93 (12H, м), 1.98-2.03 (8H, м), 2.12 (4H, с), 3.03-3.06 (4H, м).

Спектр ЯМР¹³C (100 МГц, DMSO), δ, м. д. (J, Гц): 28.33 (8CH₂); 33.66 (4CH); 35.78 (4CH); 41.21 (2CH₂); 157.45 (4C=N).

Выход: 2.24 г (80%).

Прикрепленные документы: ЯМР (дигомоадамтан[4,5-*b*;4,5-*e*]пиразин).pdf

Печать

Рисунок 2. Вкладка интерфейса разработанной информационной системы при проведении синтеза дигомоадамтан[4,5-*b*;4,5-*e*]пиразина.

Как видно из Рисунка 2, в системе предусмотрен календарь и возможность указывать дату проведения химической реакции. Информационная система позволит получать статистический отчет о количестве выполненных исследований, с отдельным указанием количества и процентной доли неудачных результатов.

На Рисунке 3 изображен график, на котором видно, что среднее время фиксации основных операций в электронном лабораторном журнале меньше, чем в бумажном.

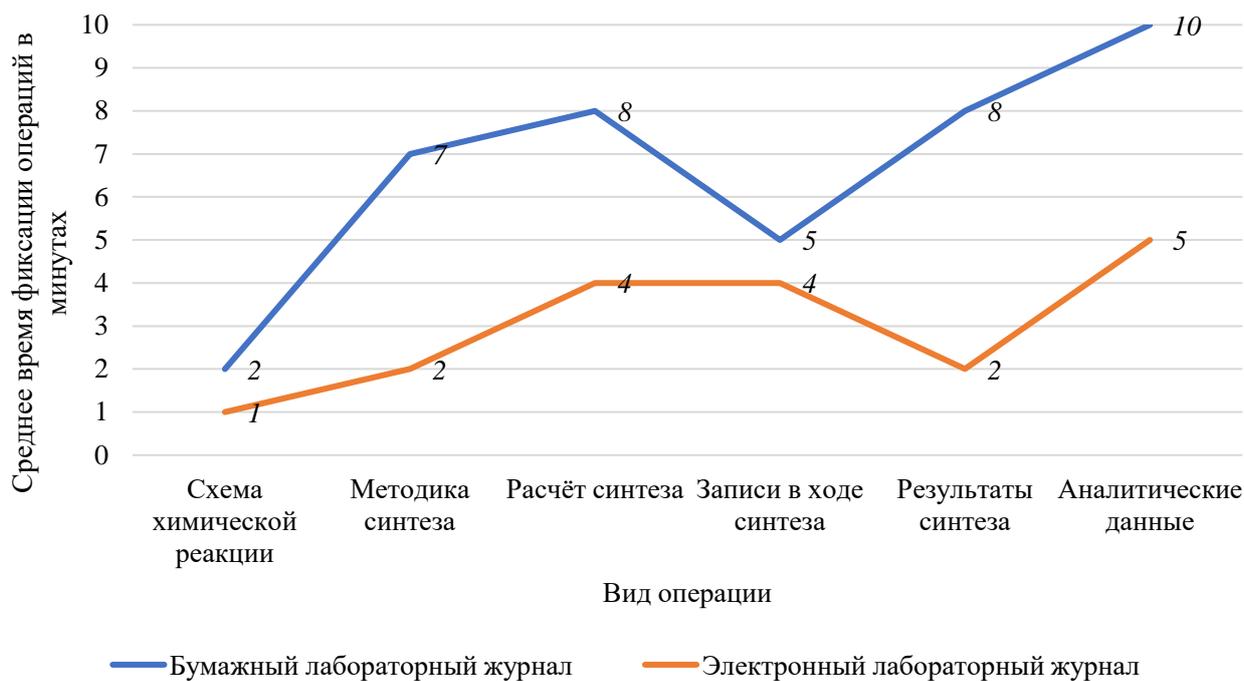


Рисунок 3. Среднее время фиксации операций в лабораторном журнале в бумажной и электронной форме.

Заключение

Таким образом, электронный лабораторный журнал для учета результатов органического синтеза обеспечит оперативный доступ к необходимым данным и облегчит работу химика-синтетика, поможет легко составить отчет, написать статью или создать презентацию. Электронный лабораторный журнал значительно упростит поиск и копирование данных, более безопасен, чем его бумажный аналог. Он позволит собирать файлы с аналитическими данными на одной вкладке, экономя время для поиска их на компьютере, в интернете и заменяя практику распечатки данных, которые необходимо прилагать к бумажному журналу.

Предложенная информационная система ориентирована на потребности лаборатории органической химии и полностью покрывает потребности химика-синтетика в информационных ресурсах при регистрации результатов исследований.

Список литературы:

1. Кропанев А. Ю., Лаврова Н. Н. Лабораторно-информационные менеджмент-системы для повышения эффективности работы аналитических лабораторий // Вода Magazine. 2017. №6. С. 28-31.
2. Тремуйак П., Нгуен А., Хуан Юй-Чи. Chemotion ELN: электронная лабораторная тетрадь с открытым исходным кодом для химиков в академических кругах // Журнал химической информатики. 2017. Т. 9. №1. С. 1-13.

References:

1. Kropanev, A. Yu., & Lavrova, N. N. (2017). Laboratorno-informatsionnye menedzhment-sistemy dlya povysheniya effektivnosti raboty analiticheskikh laboratorii. *Voda Magazine*, (6), 28-31. (in Russian).
2. Tremuiak, P., Nguyen A., Huang Yu-Chi. (2017). Chemotion ELN: elektronnyaya laboratornaya tetrad' s otkryтым iskhodnym kodom dlya khimikov v akademicheskikh krugakh. *Zhurnal khimicheskoi informatiki*, 9(1), 1-13. (in Russian).

*Работа поступила
в редакцию 15.12.2020 г.*

*Принята к публикации
19.12.2020 г.*

Ссылка для цитирования:

Дмитриева Ю. А., Лиманова Н. И., Губин В. В. Информационная система для регистрации результатов исследований химика-синтетика // Бюллетень науки и практики. 2021. Т. 7. №1. С. 223-229. <https://doi.org/10.33619/2414-2948/62/21>

Cite as (APA):

Dmitrieva, Yu., Limanova, N., & Gubin, V. (2021). Information System for Registration of Research Results of a Synthetic Chemist. *Bulletin of Science and Practice*, 7(1), 223-229. (in Russian). <https://doi.org/10.33619/2414-2948/62/21>